
科学家基于“离子门”效应设计新型分子筛材料

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/37028.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

科学家基于“离子门”效应设计新型分子筛材料。近日，中国科学院大连化学物理研究所研究员郭鹏、中国工程院院士刘中民团队与辽宁师范大学教授李国辉团队合作，设计构筑了一种高效选择性吸附分离二氧化碳/乙炔（CO₂/C₂H₂）的分子筛材料，并结合结构解析及理论计算揭示了吸附分离过程中离子门效应的新机制。相关成果发表在《德国应用化学》。

C₂H₂是一种重要的化工原料，广泛应用于石油化工和机械制造等领域。然而，在其生产过程中往往伴随有CO₂的生成。目前，CO₂/C₂H₂分离主要依赖于高能耗的溶剂萃取和低温精馏方法。相比之下，吸附分离是一种更具前景的分离方法，特别是利用优先选择性吸附CO₂的吸附剂一步获得高纯C₂H₂。然而，由于CO₂和C₂H₂的动力学尺寸、极化率等十分接近，开发具有优先选择性吸附CO₂的吸附剂仍面临挑战。

本工作中，团队提出基于离子门效应的小孔分子筛吸附剂设计策略。研究人员以小孔CHA分子筛为研究对象，基于对CHA拓扑结构的拆解，设计理想的骨架外阳离子个数及骨架硅铝比，并通过精确调控分子筛的硅铝比、阳离子类型及含量等参数，构筑了选择性识别吸附CO₂分子的K-CHA分子筛，实现了C₂H₂的一步高效纯化，并利用X-射线粉末衍射结构精修，从原子层面确定了K离子在K-CHA骨架中的落位。进一步，研究人员结合理论计算表征揭示了K-CHA选择性吸附分离CO₂/C₂H₂的机制。在之前报道的离子门效应中，占据孔口的离子短暂可逆地迁移使得气体分子扩散通过，本工作中，研究人员发现离子与气体分子会发生协同迁移，离子在不同的晶体学落位上将发生重排。这为离子门机制提供了新的见解。

该研究为设计选择性吸附分离的分子筛材料提供了理论依据。（来源：中国科学报 孙丹宁）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1002/anie.202522386>

作者：郭鹏等 来源：《德国应用化学》

更多科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发